D-MATH
Dr. Vasile Gradinaru
Kjetil Olsen Lye

Serie 4

Abgabedatum: Di. 27.3 / Mi. 28.3, in den Übungsgruppen, oder im HG J 68.
Koordinatoren: Kjetil Olsen Lye, HG G 56.1 `kjetil.lye@sam.math.ethz.ch`
Webpage: `http://metaphor.ethz.ch/x/2018/fs/401-1662-10L`

1. *Trajektorie bei Streuung (Prüfungsaufgabe FS 13)*

Die Trajektorie eines Teilchens bei Streuung an einem Potential $U(x, y)$ wird beschrieben durch:

$$\ddot{\underline{r}} = -\nabla U$$

wobei $\underline{r} = (x, y)^{\mathrm{T}}$ die Teilchenkoordinaten sind und U das Lennard-Jones Potential:

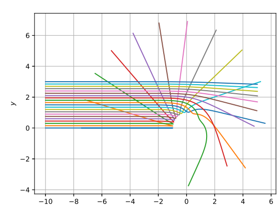
$$U(x, y) = 4\left(\left(\frac{1}{r}\right)^{12} - \left(\frac{1}{r}\right)^{6}\right)$$

ist und $r^2 = x^2 + y^2$.

a) Plotten Sie die Teilchen-Trajektorien, die sich mit dem Störmer-Verlet Verfahren ergeben.

b) Verwenden Sie folgende Anfangsbedingungen und Parameter:

- $\underline{r}(t = 0) = (-10, b)^{\mathrm{T}}$, wobei $b = 0.15, 0.3, 0.45, \ldots, 3$,
- $\dot{\underline{r}}(t = 0) = (1, 0)^{\mathrm{T}}$,
- Zeitschritt $\Delta t = 0.02$,
- Endzeit $T_{\text{ende}} = 15$.



Hinweis: Benutzen Sie das Template `lennard_jones.py`

Bitte wenden!

2. *Molekulardynamik*

Wir betrachten ein System von N Teilchen, deren paarweise Wechselwirkung durch das Lennard-Jones Potential $U(r) = U(\|\underline{x}\|)$ gegeben ist:

$$U(r) = 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6} \right) \tag{1}$$

und:

$$V(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_N) := \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{N} U(\|\underline{x}_i - \underline{x}_j\|) \tag{2}$$

Die Hamiltonfunktion des Systems ist dann:

$$\mathcal{H}(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_N, \underline{p}_1, \dots, \underline{p}_N) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\underline{p}_i^2}{2m} + V(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_N)\,. \tag{3}$$

Verwenden Sie die Hamiltongleichungen zur Herleitung der Bewegungsgleichungen.

a) Implementieren Sie das Velocity-Verlet Verfahren (8).

b) Implementieren Sie das Leap-Frog Verfahren (9).

Hinweis (aus dem Skript): Aus den Hamiltongleichungen:

$$\begin{aligned} \dot{\underline{x}}_i &= \nabla_{\underline{p}_i} \mathcal{H} \\ \dot{\underline{p}}_i &= -\nabla_{\underline{x}_i} \mathcal{H} \end{aligned} \tag{4}$$

folgt

$$\begin{aligned} \dot{\underline{x}}_i &= \underline{v}_i \\ \dot{\underline{v}}_i &= -\nabla_{x_i} V(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_N) \end{aligned} \tag{5}$$

oder

$$m\ddot{\underline{x}}_i = \underline{F}_i \tag{6}$$

Die Ableitung in Gl. (6) approximieren wir mit finiten Differenzen 2. Ordnung.

$$\begin{aligned} m_i \frac{\underline{x}_i^{n+1} - 2\underline{x}_i^n + \underline{x}_i^{n-1}}{\delta t^2} &= \underline{F}_i^n \\ \Rightarrow \underline{x}_i^{n+1} &= 2\underline{x}_i^n - \underline{x}_i^{n-1} + \delta t^2 \underline{F}_i^n \end{aligned} \tag{7}$$

Zur numerischen Lösung benutzen wir das Velocity-Verlet (8) und das Leap-Frog Verfahren (9).

$$\begin{aligned} \underline{v}_i^{n+1} &= \underline{v}_i^n + \frac{\delta t}{2} \left(\underline{F}_i^n + \underline{F}_i^{n+1} \right) \\ \underline{x}_i^{n+1} &= \underline{x}_i^n + \delta t\, \underline{v}_i^n + \frac{\delta t^2}{2} \underline{F}_i^n \end{aligned} \tag{8}$$

$$\begin{aligned} \underline{v}_i^{n+} &= \underline{v}_i^{n-} + \delta t\, \underline{F}_i^n \\ \underline{x}_i^{n+1} &= \underline{x}_i^n + \delta t\, \underline{v}_i^{n+} \end{aligned} \tag{9}$$

Siehe nächstes Blatt!

Da beim Leap-Frog Verfahren die Geschwindigkeiten um $\frac{\delta t}{2}$ verschoben sind, müssen wir einmalig den Startwert anpassen:

$$\underline{v}_i^- = \underline{v}_i^0 - \frac{\delta t}{2} \underline{F}_i^0 \tag{10}$$

Zur Berechnung der kinetischen Energie interpolieren wir die Geschwindigkeiten zu den Zeiten t_n linear:

$$\underline{v}_i^n = \frac{\underline{v}_i^{n+} + \underline{v}_i^{n-}}{2} \tag{11}$$

c) Integrieren Sie das System von $t = [0, \ldots, 60]$ mit $\delta t = 0.05$.

Hinweis: Die Funktion `init_pos_vel` aus `md_Template.py` erzeugt die Anfangswerte.

d) Berechnen Sie die kinetische, potentielle und totale Energie für jeden Zeitschritt und erstellen Sie einen Plot.

e) Was geschieht, wenn man einen gegebenen Anfangszustand mit einer minimalen Störung versieht?

Die Funktion `small_perturbation` aus dem Template simuliert zwei 25-Teilchen Systeme welche zu Beginn gleichmässig auf einem Gitter verteilt sind mit zufällig ausgewählten Geschwindigkeiten auf einem Kreis mit Radius 10^{-4}. Beim gestörten System wird bei einem einzigen Teilchen die Geschwindigkeit um 10^{-10} erhöht. Führe oben genannte Funktion aus und beschreibe deine Beobachtungen.

Warnung: Die Berechnungen können mehrere Minuten in Anspruch nehmen.

f) Interpretieren und erklären Sie die einzelnen Plots aus der vorangehenden Unteraufgabe.

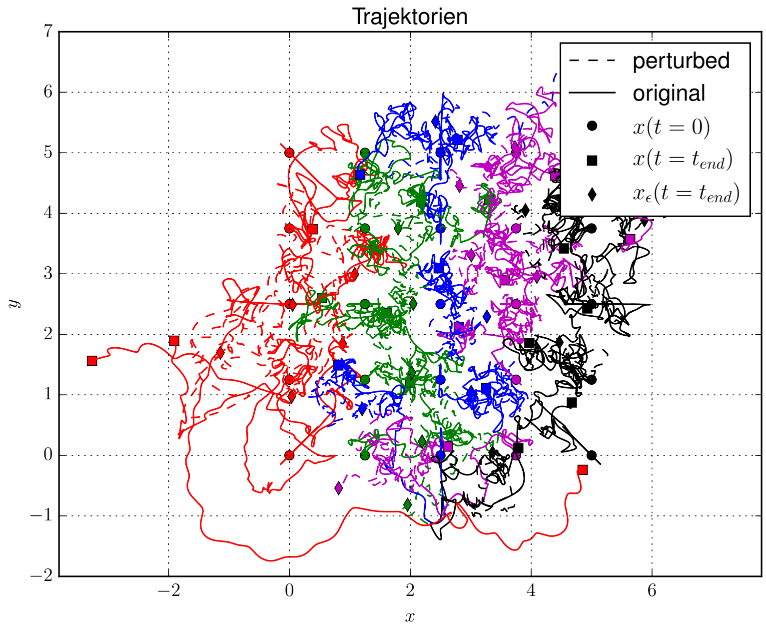


Abbildung 1 – Aufgabe 1: Trajektorien (Zufällige Perturbation!)

3. *Simples Splittingverfahren*

Die folgende ODE beschreibt die Drehung und gleichzeitiges Schrumpfen eines Vektors in $\mathbb{R}^2$.

$$\frac{d}{dt}\underline{y} = \frac{dR}{dt} \cdot R^{-1} \cdot \underline{y} + b\,\underline{y} \tag{12}$$

mit $b = -0.1$ und der Rotationsmatrix

$$R(t) = \begin{pmatrix} \cos\theta t & -\sin\theta t \\ \sin\theta t & \cos\theta t. \end{pmatrix} \tag{13}$$

a) Identifizieren Sie die Rotations- und Streckungsterme in der ODE. Splitten Sie die ODE in die zwei Terme.

b) Lösen Sie die beiden ODEs welche Sie durch das Splitting erhalten haben analytisch.

Hinweis: Die beiden Terme haben eine klare geometrische Bedeutung. Nutzen Sie dies aus um analytische Lösungen zu finden.

c) Implementieren Sie das Strang-Splittingverfahren und integrieren Sie die ODE mit dem Startwert $\underline{y} = (1, 0)$ bis $t = 100$.

Hinweis: Implementieren Sie autonome Lösungsoperatoren.